

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局(43) 国際公開日
2005 年 3 月 31 日 (31.03.2005)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2005/029352 A1

- (51) 国際特許分類⁷: G06F 17/16
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2004/013734
- (22) 国際出願日: 2004 年 9 月 21 日 (21.09.2004)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願2003-330290 2003 年 9 月 22 日 (22.09.2003) JP
- (71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 日本電気株式会社 (NEC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目 7 番 1 号 Tokyo (JP). NEC ソフト株式会社 (NEC SOFT, LTD.) [JP/JP]; 〒1368608 東京都江東区新木場一丁目 1 8 番 6 号 Tokyo (JP).

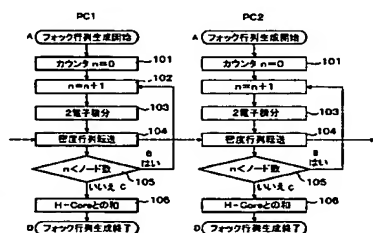
- (72) 発明者; および
- (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 高田 俊和 (TAKADA, Toshikazu) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区

- 芝五丁目 7 番 1 号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 山本 純一 (YAMAMOTO, Jun-ichi) [JP/JP]; 〒1368608 東京都江東区新木場一丁目 1 8 番 6 号 NEC ソフト株式会社内 Tokyo (JP). 中田 一人 (NAKATA, Kazuto) [JP/JP]; 〒1368608 東京都江東区新木場一丁目 1 8 番 6 号 NEC ソフト株式会社内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 宮崎 昭夫, 外 (MIYAZAKI, Teruo et al.); 〒1070052 東京都港区赤坂 1 丁目 9 番 2 0 号 第 1 6 興和ビル 8 階 Tokyo (JP).
- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

[続葉有]

(54) Title: PARALLEL CALCULATION METHOD AND DEVICE

(54) 発明の名称: 並列計算方法及び装置



A... FOCK MATRIX GENERATION START
101... COUNTER n=0
102... n=n+1
103... TWO-ELECTRON INTEGRATION
104... DENSITY MATRIX TRANSFER
105... n < N
106... H-CORE SUM
107... FOCK MATRIX GENERATION END

(57) Abstract: There is provided a method for executing a calculation of the Hartley-Fock method in the molecular orbital method by using a distributed-memory type parallel computer composed of a computer cluster having a plurality of computers. The method includes: a step of dividing the density matrix required for calculation of the Fock matrix into a plurality of partial density matrixes and distributing/storing them in respective computers; and a step of executing operations such as two-electron integration associated with the partial density matrixes in each of the computers while successively transferring the partial density matrixes between the computers.

(57) 要約:

複数の計算機とを備えた計算機クラスタで構成される分散メモリ型並列計算機において分子軌道法におけるハートリー・フォック法の計算を実行するための方法であって、フォック行列の算出に必要な密度行列を複数の部分密度行列に分割して各計算機に分散して格納する段階と、複数の部分密度行列を複数の計算機間で順番に転送させながら、各計算機において部分密度行列に関する 2 電子積分などの演算処理を実行する段階と、からなる方法。



(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

2 文字コード及び他の略語については、定期発行される各 *PCT* ガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

添付公開書類:

— 国際調査報告書